

4-CHLOROPHENOL- n° CAS : 106-48-9

Le 4-chlorophénol est ou a été utilisé comme intermédiaire dans la synthèse de colorants et de médicaments et comme dénaturant de l'alcool. Il est aussi utilisé pour produire du 2,4-dichlorophénol et un germicide le 4-chlorophenol-o-cresol.

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	4-Chlorophénol
Synonymes	P-Chlorfenol 4-Chloro-1-Hydroxybenzene P-Chlorophenol 4-Hydroxychlorobenzene Parachlorophenol
Numéro CAS	106-48-9
Formule moléculaire	C ₆ H ₅ ClO
Code SMILES	c1(ccc(Cl)cc1)O
Structure moléculaire	

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluation existante	-
Phrases de risque et classification	<p><i>Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967)</i> Xn ; R20/21/22 N ; R51-53</p> <p><i>Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008)</i> Acute Tox. 4 H332 Acute Tox. 4 H312 Acute Tox. 4 H302 Aquatic Chronic 2 H411</p>
Critères PBT / POP	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB ¹ (C.E., 2006) ou POP ² (PNUÉ, 2001).
Effets endocriniens	Le 4-chlorophénol n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004) et dans le rapport d'étude de la DG ENV sur la mise à jour de la liste prioritaire des perturbateurs endocriniens à faible tonnage (Petersen <i>et al.</i> , 2007).
Normes de qualité existantes	<p><u>Allemagne</u> : Norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L (ETOX, 2007³)</p> <p><u>Colombie Britannique</u> : valeurs guides pour la vie aquatique : 0.85 à 29.5 µg/L pour des pH compris entre 5.7 et 9.2. (Warrington, 1997).</p>
Mesure de restriction	-
Substance(s) associée(s)	Chlorophénols : 3-chlorophénol (CAS n°: 108-43-0), 2-chlorophénol (CAS n°: 95-57-8), 2,4-dichlorophénol (CAS n°: 120-83-2)

¹ Les PBT sont des substances persistantes, bioaccumulables et toxiques et les vPvB sont des substances très persistantes et très bioaccumulables. Les critères utilisés pour la classification des PBT sont ceux fixés par l'Annexe XIII du règlement n°1907/2006 (REACH).

² Les Polluants Organiques Persistants (POP) sont des substances persistantes (aux dégradations biotiques et abiotiques), fortement liposolubles (et donc fortement bioaccumulables), et volatiles (et peuvent donc être transportées sur de longues distances et être retrouvée de façon ubiquitaire dans l'environnement). Les critères utilisés pour la classification POP sont ceux fixés par l'Annexe 5 de la Convention de Stockholm placée sous l'égide du PNUÉ (Programme des Nations Unies pour l'Environnement).

³ Les données issues de cette source (<http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>) ne sont données qu'à titre indicatif ; elles n'ont donc pas fait l'objet d'une validation par l'INERIS.

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeurs	Source
Poids moléculaire [g/mol]	128.56	HSDB, 2011
Hydrosolubilité [mg/L]	24000 à 25°C	HSDB, 2011
Pression de vapeur [Pa]	11.6 à 25°C	HSDB, 2011
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	0.06	HSDB, 2011
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	2.39	HSDB, 2011
Coefficient d'adsorption (carbone organique) (Koc) [L/kg]	70 – 485.6	HSDB, 2011
Constante de dissociation (pKa)	9.41	HSDB, 2011

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	Le 4-chlorophénol ne possède pas de groupe fonctionnel hydrolysable.	HSDB, 2011
Photolyse	Des temps de demi-vies de photolyse dans l'eau de 2 à 14 jours sont cités par MacKay <i>et al.</i>	MacKay <i>et al.</i> , 2000
Biodégradabilité	Le 4-chlorophénol peut être considéré comme intrinsèquement biodégradable, mais n'est pas facilement biodégradable.	HSDB, 2011

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	Le Koc du 4-chlorophénol est faible (70-485.6 L/kg). Cette substance ne s'adsorbera donc pas sur les sédiments et les particules en suspension dans l'eau.	-
Volatilisation	Le 4-chlorophénol a une faible volatilité.	-
Bioaccumulation/ Biomagnification	La bioaccumulation du 4-chlorophénol est limitée : des BCF de 10 à 360 sont cités par MacKay <i>et al.</i> (2000) Un BCF de 360 est utilisé dans la détermination des normes de qualité ce qui correspond à un BMF₁ de 1 auquel s'ajoute pour les organismes marins un BMF₂ de 1.	MacKay <i>et al.</i> , 2000

ECOTOXICITE ET TOXICITE**ORGANISMES AQUATIQUES**

Dans les tableaux ci-dessous, pour chaque taxon sont reportés uniquement les résultats des tests d'écotoxicité montrant la plus forte sensibilité à la substance. Toutes les données présentées ont été validées par l'INERIS.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, d'EC₁₀ concentration produisant 10% d'effets et équivalente à la NOEC, ou de EC₅₀, concentration produisant 50% d'effets. Les NOEC sont principalement rattachées à des tests chroniques, qui mesurent l'apparition d'effets sub-létaux à long terme, alors que les EC₅₀ sont plutôt utilisées pour caractériser les effets à court terme.

ECOTOXICITE**ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË**

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	23.5 mg/L <i>Lemna gibba</i> , EC ₅₀ (7 j)	Sharma <i>et al.</i> , 1997
		8 mg/L <i>Scenedesmus subspicatus</i> , EC ₅₀ (96 h)	Kühn et Pattard, 1990
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	2.5 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (48 h)	Kühn <i>et al.</i> , 1989
	Milieu marin	4.6 mg/L <i>Crangon septemspinosa</i> , LC ₅₀ (96 h)	McLeese <i>et al.</i> , 1979
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	3.8 mg/L <i>Lepomis macrochirus</i> , LC50 (96 h)	Buccafusco <i>et al.</i> , 1981
	Milieu marin	5 mg/L <i>Platichthys flesus</i> , LC ₅₀ (96 h)	Smith <i>et al.</i> , 1994

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	Pas d'information disponible.	
	Milieu marin	0.3 mg/L <i>Phytoplankton spp</i> , croissance, 4 à 6 semaines	Kuiper, 1984
Invertébrés	Eau douce	0.2 mg/L <i>Ceriodaphnia dubia</i> , NOEC (9 j)	Cowgill et Milazzo, 1991
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	Pas d'information disponible.	
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

NORMES DE QUALITE POUR LA COLONNE D'EAU

Les normes de qualité pour les organismes de la colonne d'eau sont calculées conformément aux recommandations du projet de guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2010). Elles sont obtenues en divisant la plus faible valeur de NOEC ou d'EC₅₀ valide par un facteur d'extrapolation (AF, *Assessment Factor*).

La valeur de ce facteur d'extrapolation dépend du nombre et du type de tests pour lesquels des résultats valides sont disponibles. Les règles détaillées pour le choix des facteurs sont données dans le guide technique européen (E.C., 2010).

En ce qui concerne les organismes marins, selon le projet de document guide technique pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2010), la sensibilité des espèces marines à la toxicité des substances organiques peut être considérée comme équivalente à celle des espèces dulçaquicoles, à moins qu'une différence ne soit montrée.

Néanmoins, le facteur d'extrapolation appliqué pour déterminer la AA-QS_{marine_eco} doit prendre en compte les incertitudes additionnelles telles que la sous-représentation de taxons clefs et une diversité d'espèces plus complexe en milieu marin.

- **Moyenne annuelle (AA-QS_{water_eco} et AA-QS_{marine_eco}) :**

Une concentration annuelle moyenne est déterminée pour protéger les organismes de la colonne d'eau d'une possible exposition prolongée.

On dispose de résultats d'essais chroniques valides pour deux niveaux trophiques différents. Le résultat le plus faible a été obtenu sur Cériodaphnie, avec une valeur de NOEC sur 9 jours à 200 µg/L. Les micro-crustacés représentent par ailleurs le groupe le plus sensible pour la toxicité aiguë. La norme de qualité est déterminée en appliquant à la plus faible NOEC un facteur d'extrapolation de 50 :

$$AA-QS_{water_eco} = 200/50 \text{ µg/L, soit } 4 \text{ µg/L}$$

En ce qui concerne les organismes marins, les résultats de deux tests pour deux groupes taxonomiques différents (invertébrés et poissons) sont disponibles en aigu et un seul en chronique (algues). En l'absence de taxon additionnel (mollusque, échinodermes, ...) le facteur appliqué est de 500 conformément au guide technique européen (E.C., 2010) :

$$AA-QS_{\text{marine_eco}} = 200/500 \mu\text{g/L, soit } 0.4 \mu\text{g/L}$$

- **Concentration Maximum Acceptable (MAC et MAC_{marine})**

La concentration maximale acceptable est calculée afin de protéger les organismes de la colonne d'eau de possibles effets de pics de concentrations de courtes durées (E.C., 2010)

On dispose de données aiguës sur les trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons), la plus faible étant celle sur *Daphnia magna*, EC₅₀ (48 h) = 2.5 mg/L. Un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC :

$$MAC = 2.5/100 = 0.025 \text{ mg/L, soit } 25 \mu\text{g/L}$$

Pour le milieu marin, un facteur d'extrapolation de 1000 s'applique pour calculer la MAC_{marine} :

$$MAC_{\text{marine}} = 2.5/1000 = 0.0025 \text{ mg/L, soit } 2.5 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS _{water_eco}]	4	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	25	µg/L
Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau marine		
Moyenne annuelle [AA-QS _{marine_eco}]	0.4	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC _{marine}]	2.5	µg/L

VALEUR GUIDE DE QUALITE POUR LE SEDIMENT (QS_{SED} ET QS_{SED-MARIN})

Un seuil de qualité dans le sédiment est nécessaire (i) pour protéger les espèces benthiques et (ii) protéger les autres organismes d'un risque d'empoisonnement secondaire résultant de la consommation de proies provenant du benthos. Les principaux rôles des normes de qualité pour les sédiments sont de :

1. Identifier les sites soumis à un risque de détérioration chimique (la norme sédiment est dépassée)
2. Déclencher des études pour l'évaluation qui peuvent conduire à des études plus poussées et potentiellement à des programmes de mesures
3. Identifier des tendances à long terme de la qualité environnementale (Art. 4 Directive 2000/60/CE).

Aucune information d'écotoxicité pour les organismes benthiques n'a été trouvée dans la littérature.

A défaut, une valeur guide pour le sédiment peut être calculée à partir du modèle de l'équilibre de partage.

Ce modèle suppose que :

- il existe un équilibre entre la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires et la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle du sédiment,
- la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires n'est pas biodisponible pour les organismes et que seule la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle est susceptible d'impacter les organismes,
- la sensibilité intrinsèque des organismes benthiques aux toxiques est équivalente à celle des organismes vivant dans la colonne d'eau. Ainsi, la norme de qualité pour la colonne d'eau peut être utilisée pour définir la concentration à ne pas dépasser dans l'eau interstitielle.

4-CHLOROPHENOL– n° CAS : 106-48-9

Une valeur guide de qualité pour le sédiment peut être alors calculée selon l'équation suivante (E.C., 2010) :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{K_{\text{sed-eau}}}{RHO_{\text{sed}}} * AA-QS_{\text{water_eco}} [\mu\text{g/L}] * 1000$$

Avec :

RHO_{sed} : masse volumique du sédiment en $[\text{kg}_{\text{sed}}/\text{m}^3_{\text{sed}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : 1300 kg/m^3 .

$K_{\text{sed-eau}}$: coefficient de partage sédiment/eau en m^3/m^3 . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par le guide technique européen (E.C., 2010) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante : $0.8 + 0.025 * Koc$ soit $K_{\text{sed-eau}} = 2.55-12.94 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 7.8-39.8 \mu\text{g/kg}_{\text{sed poids humide}}$$

La concentration correspondante en poids sec peut être estimée en tenant compte du facteur de conversion suivante :

$$\frac{RHO_{\text{sed}}}{F_{\text{solide}_{\text{sed}}} * RHO_{\text{solide}}} = \frac{1300}{500} = 2.6$$

Avec :

$F_{\text{solide}_{\text{sed}}}$: fraction volumique en solide dans les sédiments en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : $0.2 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

RHO_{solide} : masse volumique de la partie sèche en $[\text{kg}_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{solide}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : 2500 kg/m^3 .

Pour le 4-chlorophénol, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry_weight}} = QS_{\text{sed wet weight}} * 2.6 = 20.28-103.48 \mu\text{g/kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Selon la même approche que pour le sédiment d'eau douce, une valeur guide de qualité pour le sédiment marin peut être calculée selon la formule suivante :

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{K_{\text{sed-eau}}}{RHO_{\text{sed}}} * AA-QS_{\text{marine_eco}} [\mu\text{g/L}] * 1000$$

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} = 0.78-3.98 \mu\text{g/kg (poids humide)}$$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante :

$$QS_{\text{sed-marin dry_weight}} = 2.028-10.348 \mu\text{g/kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Le LogKow de la substance étant inférieur à 5, un facteur additionnel de 10 n'est pas jugé nécessaire.

Il faut rappeler que les incertitudes liées à l'application du modèle de l'équilibre de partage sont importantes. Les sédiments naturels peuvent avoir des propriétés très variables en termes de composition (nature et quantité de matières organiques, composition minéralogique), de granulométrie, de conditions physico-chimiques, de conditions dynamiques (taux de déposition/taux de resuspension). Par ailleurs ces propriétés

Validation groupe d'experts : Mars 2011

Version 4 : 29/03/2011

Page 7

DRC-11-112070-04189A

peuvent évoluer dans le temps en fonction notamment des conditions météorologiques et de la morphologie de la masse d'eau. Si bien que le partage entre la fraction de substance adsorbée et la fraction de substance dissoute peut être extrêmement variable d'un sédiment à un autre et l'hypothèse d'un équilibre entre ces deux fractions ne semble pas très réaliste pour des conditions naturelles.

Par ailleurs, certains organismes benthiques peuvent ingérer les particules sédimentaires, et donc être contaminés par la fraction de substance adsorbée sur ces particules, ce qui n'est pas pris en compte par la méthode.

Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce)	8	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids humide
	20	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids sec
Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau marine)	0.8	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids humide
	2	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids sec
Conditions particulières	Avec un Koc compris entre 70 et 485.6 L/kg et un Log Kow < 3, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2010).	

EMPOISONNEMENT SECONDAIRE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur les prédateurs *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés (appelés biote, i.e. poissons ou invertébrés vivant dans la colonne d'eau ou dans les sédiments). Il s'agit donc d'évaluer la toxicité chronique de la substance par la voie d'exposition orale uniquement.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. N'ont été recherchés que des tests sur mammifères ou oiseaux exposés par voie orale (exposition par l'alimentation ou par gavage). Toutes les données présentées ont été jugées valides puisqu'elles sont issues de rapports ayant fait l'objet d'une expertise collective internationale.

Les résultats de toxicité sont principalement donnés sous forme de doses journalières : NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*). NOAEL et LOAEL sont exprimées en termes de quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé, et par jour.

Pour calculer la norme de qualité liée à l'empoisonnement secondaire des prédateurs, il est nécessaire de connaître la concentration de substance dans le biota n'induisant pas d'effets observés pour les prédateurs (exprimée sous forme de NOEC). Il est possible de déduire une NOEC à partir d'une NOAEL grâce à des facteurs de conversion empiriques variables selon les espèces testées. Les facteurs utilisés ici sont ceux recommandés le projet de guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (E.C., 2010). Les valeurs de ces facteurs de conversion dépendent de la masse corporelle des animaux et de leur consommation journalière de nourriture. Celles-ci peuvent donc varier d'une façon importante selon le niveau d'activité et le métabolisme de l'animal, la valeur nutritive de sa nourriture, etc. En particulier elles peuvent être très différentes entre un animal élevé en laboratoire et un animal sauvage.

Afin de couvrir ces sources de variabilité, mais aussi pour tenir compte des autres sources de variabilité ou d'incertitude (variabilité inter et intra-espèces, extrapolation du court terme au long terme, etc.) des facteurs d'extrapolation sont nécessaires pour le calcul de la $QS_{\text{biota_sec}} \text{ pois}$. Les valeurs recommandées pour ces facteurs d'extrapolation sont données dans le guide technique européen (E.C., 2010). Un facteur d'extrapolation supplémentaire ($AF_{\text{dose-réponse}}$) est utilisé dans le cas où la toxicité a été établie à partir d'une LOAEL plutôt que d'une NOAEL.

ECOTOXICITE POUR LES VERTEBRES TERRESTRES

Pour le 4-chlorophénol, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. Comme le 2,4-dichlorophénol est une substance similaire ayant des propriétés physico-chimiques proches du 4-chlorophénol, les résultats d'essais réalisés sur 2,4-dichlorophénol sont présentés ci-dessous et sont utilisés pour la détermination de la norme de qualité et de la VTR.

TOXICITE ORALE POUR LES MAMMIFERES

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.				
Toxicité pour la reproduction	Rat (1 ^{ère} génération) Exposition <i>in utero</i> , au cours de la lactation et enfin dans l'eau de boisson Modification de l'immuno-compétence In utero, 3 semaines de lactation, puis 15 semaines	NOAEL = 0.3 ⁽¹⁾	Exon et Koller, 1985 cité dans US-EPA, 1988	10	3 (Essai réalisé sur le 2,4-dichlorophénol)

(1) Cette valeur a été utilisée par l'US-EPA pour la détermination de la VTR du 2,4 dichlorophénol.

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.				
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

NORME DE QUALITE EMPOISONNEMENT SECONDAIRE (QS_{BIOTA_SEC POIS})

La norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire (QS_{biota_sec pois}) est calculée conformément aux recommandations du guide technique européen (E.C., 2010). Elle est obtenue en divisant la plus faible valeur de NOEC valide par les facteurs d'extrapolation recommandés (E.C., 2010).

Pour le 4-chlorophénol, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. C'est pourquoi les résultats d'essais réalisés sur le 2,4-dichlorophénol sont utilisés pour la détermination de la norme de qualité empoisonnement secondaire. Ainsi, un facteur de 90 est appliqué car le test retenu (NOAEL à 0.3 mg/kg_{corporel}/j sur le rat, soit une NOEC de 3 mg/kg_{biota}) est de 90 jours. On obtient donc :

$$QS_{\text{biota_sec pois}} = 3 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / 90 = 0.033 \text{ mg/kg}_{\text{biota}} = 33 \text{ }\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$$

Cette valeur de norme de qualité pour l’empoisonnement secondaire peut être ramenée :

- à une concentration dans l’eau douce selon la formule suivante :

$$QS_{\text{water sp}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{\text{biota_sec pois}} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF [L/kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1}$$

- à une concentration dans l’eau marine selon la formule suivante :

$$QS_{\text{marin sp}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{\text{biota_sec pois}} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF [L/kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1 * \text{BMF}_2}$$

Avec :

BCF : facteur de bioconcentration,

BMF₁ : facteur de biomagnification,

BMF₂ : facteur de biomagnification additionnel pour les organismes marins.

Ce calcul tient compte du fait que la substance présente dans l’eau du milieu peut se bioaccumuler dans le biote. Il donne la concentration à ne pas dépasser dans l’eau afin de respecter la valeur de la norme de qualité pour l’empoisonnement secondaire déterminée dans le biote.

La bioaccumulation tient compte à la fois du facteur de bioconcentration (BCF, ratio entre la concentration dans le biote et la concentration dans l’eau) et du facteur de biomagnification (BMF, ratio entre la concentration dans l’organisme du prédateur en bout de chaîne alimentaire, et la concentration dans l’organisme de la proie au début de la chaîne alimentaire). En l’absence de valeurs mesurées pour le BMF₁ et BMF₂, celles-ci peuvent être estimées à partir du BCF selon le guide technique européen (E.C., 2010).

Ce calcul n’est donné qu’à titre indicatif. Il fait en effet l’hypothèse qu’un équilibre a été atteint entre l’eau et le biote, ce qui n’est pas véritablement réaliste dans les conditions du milieu naturel. Par ailleurs il repose sur un facteur de bioaccumulation qui peut varier de façon importante entre les espèces considérées.

Pour le 4-chlorophénol, un BCF de 360 (MacKay *et al.*, 2000) et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2010) ont été retenus. On a donc:

$$QS_{\text{water sp}} = 33 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (360 * 1) = 0.093 \text{ }\mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 33 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (360 * 1 * 1) = 0.093 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l’empoisonnement secondaire des prédateurs	33	$\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l’eau (douce et marine)	0.1	$\mu\text{g/L}$

SANTE HUMAINE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur l’homme soit *via* la consommation d’organismes aquatiques contaminés, soit *via* l’eau de boisson.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d’obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. Compte tenu du

mode d'exposition envisagée, seuls les tests sur mammifères exposés par voie orale (dans l'alimentation ou par gavage) ont été recherchés.

Toutes les données présentées ont été validées.

Les résultats de toxicité sont principalement donnés sous forme de doses journalières : NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*). NOAEL et LOAEL sont exprimées en termes de quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé, et par jour.

TOXICITE

Pour l'évaluation des effets sur la santé humaine, seuls les résultats sur mammifères sont considérés comme pertinents. Contrairement à l'évaluation des effets pour les prédateurs, les effets de type cancérogène ou mutagène sont également pris en compte.

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [mg/kg _{corporel} /j]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.			
Toxicité pour la reproduction	Rat (1 ^{ère} génération) Exposition <i>in utero</i> , au cours de la lactation et enfin dans l'eau de boisson Modification de l'immuno-compétence In utero, 3 semaines de lactation, puis 15 semaines	NOAEL = 0.3	Exon et Koller, 1985 cité dans US-EPA, 1988	3.10 ⁻³⁽¹⁾ Facteur d'incertitude utilisé : 100 Avec AF inter-espèces = 10 AF intra-espèces = 10 (Essai réalisé sur le 2,4-dichlorophénol)

(1) Cette VTR a été déterminée par l'US-EPA pour le 2,4-dichlorophénol.

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	Selon l'IARC, le mélange des chlorophénols pourrait être cancérigène pour l'homme (classification des chlorophénols en 2B).	IARC, 1987
	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais n'a pas fait l'objet d'un classement pour la cancérogénèse.	C.E., 2008
Mutagénèse	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais n'a pas fait l'objet d'un classement pour la mutagénèse.	C.E., 2008
Toxicité pour la reproduction	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais n'a pas fait l'objet d'un classement pour la reproduction.	C.E., 2008

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA LA CONSOMMATION DES PRODUITS DE LA PECHE (QS_{BIOTA_HH})

La norme de qualité pour la santé humaine est calculée de la façon suivante (E.C., 2010):

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons. Journ. Moy.} [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} * \frac{1}{F_{\text{sécurité}}}$$

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1). La VTR donnée ne tient compte en effet que d'une exposition par voie orale, et pour la consommation de produits de la pêche uniquement. Mais la contamination peut aussi se faire par la consommation d'autres sources de nourriture, par la consommation d'eau, et d'autres voies d'exposition sont possibles (inhalation ou contact cutané). Le facteur correctif de 10% (soit 0.1) permet de rendre l'objectif de qualité plus sévère d'un facteur 10 afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.
- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour; pour le 4-chlorophénol, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. C'est pourquoi la VTR ($3 \cdot 10^{-3}$ mg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus) = 3 µg/kg_{corporel}/j) déterminée pour le 2,4-dichlorophénol est utilisée,
- F_{sécurité} : facteur de sécurité supplémentaire de 10 pour tenir compte du fait que le mélange des chlorophénols peut présenter des effets cancérigènes possibles et du fait que la durée de l'essai utilisé est courte,
- Cons. Journ. Moy : une consommation moyenne de produits de la pêche (poissons, mollusques, crustacés) égale à 115 g par jour,
- un poids corporel moyen de 70 kg,

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il peut être inadapté pour couvrir les risques pour les individus plus sensibles ou plus vulnérables (masse corporelle plus faible, forte consommation de produits de la pêche, voies d'exposition individuelles particulières). Le facteur correctif de 10% n'est donné que par défaut, car la contribution des différentes voies d'exposition varie selon les propriétés de la substance (et en particulier sa distribution entre les différents compartiments de l'environnement), ainsi que selon les populations considérées (travailleurs exposés, exposition pour les consommateurs/utilisateurs, exposition via l'environnement uniquement). L'hypothèse cependant que la consommation des produits de la pêche ne représente pas plus de 10% des apports journalier contribuant à la dose journalière tolérable apporte une certaine marge de sécurité (E.C., 2010).

Pour le 4-chlorophénol, le calcul aboutit à :

Validation groupe d'experts : Mars 2011

Version 4 : 29/03/2011

Page 12

DRC-11-112070-04189A

4-CHLOROPHENOL– n° CAS : 106-48-9

$$QS_{\text{biota hh}} = \frac{0.1 * 3 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} * \frac{1}{10} = 18.26 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

Comme pour l'empoisonnement secondaire, la concentration correspondante :

- dans l'eau douce peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

$$QS_{\text{water_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1}$$

- dans l'eau marine peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

$$QS_{\text{marin_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1 * \text{BMF}_2}$$

Pour le 4-chlorophénol, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 18.26 / (360*1) = 0.05 \mu\text{g}/\text{L}$$

$$QS_{\text{marin_hh food}} = 18.26 / (360*1*1) = 0.05 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	18	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
Valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	0.05	$\mu\text{g}/\text{L}$

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA L'EAU DE BOISSON ($QS_{\text{DW_HH}}$)

La norme de qualité pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (E.C., 2010) :

$$QS_{\text{eau brute}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{0.1 * \text{VTR} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau} [\text{L}/\text{j}]} * \frac{1}{F_{\text{sécurité}}}$$

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.
- la valeur toxicologique de référence (VTR), pour cette substance, elle sera considérée égale à $3.10^{-3} \text{ mg}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$ (Cf. tableau ci-dessus),
- une consommation d'eau moyenne de 2 L par jour,
- $F_{\text{sécurité}}$: facteur de sécurité supplémentaire de 10 pour tenir compte du fait que le mélange des chlorophénols peut présenter des effets cancérigènes possibles et du fait que la durée de l'essai utilisé est courte,
- un poids corporel moyen de 70 kg,

L'eau de boisson est obtenue à partir de l'eau brute du milieu après traitement pour la rendre potable. La fraction éliminée lors du traitement dépend de la technologie utilisée ainsi que des propriétés de la substance.

4-CHLOROPHENOL– n° CAS : 106-48-9

$$QS_{dw_hh} [\mu\text{g/L}] = \frac{QS_{\text{eau brute}} [\mu\text{g/L}]}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

En l'absence d'information, on considèrera que la fraction éliminée est nulle et le critère pour l'eau de boisson s'appliquera alors à l'eau brute du milieu. Par ailleurs, on rappellera que ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif et peut s'avérer inadéquat pour certaines substances et certaines populations.

Pour le 4-chlorophénol, on obtient :

$$QS_{dw_hh} = \frac{0.1 * 3 * 70}{2 * (1 - 0)} * \frac{1}{10} = 1.05 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	1	μg/L
--	---	------

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE (NQE)

La NQE est définie à partir de la valeur de la norme de qualité la plus protectrice parmi tous les compartiments étudiés.

		Valeur	Unité
PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS _{water_eco}	4	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	25	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle	AA-QS _{marine_eco}	0.4	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable	MAC _{marine}	2.5	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota sec pois}	33	µg/kg _{biota}
	QS _{water_sp}	0.1	µg/L
	QS _{marin_sp}		
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota hh}	18	µg/kg _{biota}
	QS _{water hh food}	0.05	µg/L
	QS _{marin hh food}		
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	1	µg/L

Pour 4-chlorophénol, la norme de qualité pour l'eau douce et celle pour l'eau marine sont les valeurs les plus faibles pour l'ensemble des approches considérées et pour les compartiments considérés. La proposition de NQE pour le 4-chlorophénol est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

EAU DOUCE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQ_{EAU-DOUCE} = 0.05 \mu\text{g/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQ_{BIOTE} = 18 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau : $MAC_{EAU-DOUCE} = 25 \mu\text{g/L}$

EAU MARINE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQ_{EAU-MARINE} = 0.05 \mu\text{g/L}$

fondée sur l'empoisonnement secondaire des prédateurs $NQ_{BIOTE} = 18 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau : $MAC_{EAU-MARINE} = 2.5 \mu\text{g/L}$

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc compris entre 70 et 485.6 L/kg et un Log Kow < 3, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2010).

BIBLIOGRAPHIE

Buccafusco, R. J., S. J. Ells, *et al.* (1981). "Acute Toxicity of Priority Pollutants to Bluegill (*Lepomis macrochirus*)." Bull. Environ. Contam. Toxicol. **26**(4): 446-452.

C.E. (1967). Directive 67/548/CEE du Conseil, du 27 juin 1967, concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses. Journal officiel n°196 du 16/08/1967 p. 0001 - 0098.

C.E. (2006). Règlement (CE) N° 1907/2006 du Parlement européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) N° 793/93 du Conseil et le règlement (CE) N° 1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission, JO L 396 du 30.12.2006: p. 1–849.

C.E. (2008). Règlement (CE) no 1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) no 1907/2006.

Cowgill, U. M. and D. P. Milazzo (1991). "The Sensitivity of *Ceriodaphnia dubia* and *Daphnia magna* to Seven Chemicals Utilizing the Three-Brood Test." Arch. Environ. Contam. Toxicol. **20**(2): 211-217.

E.C. (2004). Commission staff working document on implementation of the Community Strategy for Endocrine Disrupters - a range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife (COM(1999) 706)). SEC(2004) 1372. Brussels, European Commission.

E.C. (2010). Draft Technical Guidance Document for deriving Environmental Quality Standards (February 2010 version). Not yet published.

ETOX. (2007). "ETOX: Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.

Exon, J. H. and L. D. Koller (1985). "Toxicity of 2-chlorophenol, 2,4-dichlorophenol and 2,4,6-trichlorophenol." Water Chlorination: Chemistry, Environmental Impact and Health Effects, Jolley *et al.*, RIVM **5**.

HSDB. (2011). "Hazardous Substances Data Bank." from <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>.

IARC (1987). 2,4 dichlorophenol - Genetic and related effects: an updating of selected IARC monographs. Lyon.

Kühn, R. and M. Pattard (1990). "Results of the harmful effects of water pollutants to green algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the cell multiplication inhibition test." Wat. Res. **24**(1): 31-38.

Kühn, R., M. Pattard, *et al.* (1989). "Results of the harmful effects of water pollutants to *Daphnia magna* in the 21 day reproduction test (OECDG Data File)." Wat. Res. **23**(4): 501-510.

Kuiper, J. a. (1984). "Fate and Effects of 4-Chlorophenol and 2,4-Dichlorophenol in Marine Plankton Communities in Experimental Enclosures." Ecotox. and Environ. Safety **8**(1): 15-33.

MacKay, D., W. Y. Shiu, *et al.* (2000). Physical-chemical properties and environmental fate Handbook, Chapman & Hall.

MacKay, D., W. Y. Shiu, *et al.* (2000). Physical-chemical properties and environmental fate Handbook, Chapman & Hall/ CRCnetBase.

McLeese, D. W., V. Zitko, *et al.* (1979). "Structure-lethality relationships for phenols, anilines and other aromatic compounds in shrimp and clams." Chemosph. **8**(2): 53-57.

4-CHLOROPHENOL– n° CAS : 106-48-9

Petersen, G., D. Rasmussen, *et al.* (2007). Study on enhancing the Endocrine Disrupter priority list with a focus on low production volume chemicals, DHI: 252.

PNUE (2001). Convention de Stockholm sur les Polluants Organiques Persistants: pp 47.

Sharma, H. A., J. T. Barber, *et al.* (1997). "A Comparison of the Toxicity and Metabolism of Phenols by *Lemna gibba*, with Special Reference to 2,4,5-Trichlorophenol." *Envir. Toxicol. Chem.* **16**(2): 346-350.

Smith, S., V. J. Furay, *et al.* (1994). "Evaluation of the toxicity and quantitative structure - activity relationships (QSAR) of chlorophenols to the copepodid stage of a marine copepod (*Tisbe battagliai*) and two species of benthic flatfish, the flounder (*Platichthys flesus*) and sole (*Solea solea*)." *Chemosphere* **28**(4): 825-836.

US-EPA. (1988). "Integrated Risk Information System (IRIS)." from <http://www.epa.gov/iris/>.

Warrington, P. D. (1997). Ambient Water Quality Guidelines for Chlorophenols - First update, Ministry of Water, Land and Air Protection.